

Einfluß elektrischer Felder auf die Eigenabsorptionskante fester Körper

Der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

zur

Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt von

Johann Günter Krieg

aus Nürnberg

WÜRZBURG

Springer-Verlag Berlin · Heidelberg · New York 1967

1965

Als Dissertation genehmigt
von der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Erlangen-Nürnberg



Tag der mündlichen Prüfung: 24. November 1965

Dekan: Universitätsprofessor Dr. E. Wirth

1. Berichterstatter: Universitätsprofessor Dr. W. Schultz
2. Berichterstatter: Universitätsprofessor Dr. E. Mollwo

Sonderdruck aus:

Zeitschrift für Physik, Bd. 205, 425 - 439 (1967)

Einfluß elektrischer Felder auf die Eigenabsorptionskante fester Körper

JOHANN GÜNTHER KRIEG*

Institut für Angewandte Physik der Universität Erlangen-Nürnberg

Eingegangen am 27. April 1967

This paper realizes an idea of REDFIELD¹ in a general and quantitative manner: Charged point defects produce local electric fields in a crystal which cause a change in the absorption-constant compared with the absorption-constant of an undisturbed crystal (Franz-Keldysh-effect). Thus one gets a tail in the absorption constant decreasing from the ideal intrinsic absorption edge towards longer wave-lengths.

Applying an external field F one finds an additional, frequency-dependent absorption-constant $\Delta\alpha$. Its magnitude and spectral distribution depend on the concentration of defects. For external fields smaller than the internal ones $\Delta\alpha \propto F^2$ holds at all frequencies. The results are compared with those found by FRANZ.

Einleitung

Im Bändermodell des Festkörpers beschreibt man den Vorgang der Eigenabsorption durch Elektronenübergänge vom Valenzband $E_v(k)$ in das Leitungsband $E_c(k)$. Beide „Bänder“ sind durch eine „verbotene Zone“ der energetischen Breite E_{gap} voneinander getrennt. Die nur unter der Einwirkung von Lichtquanten (z. B. ohne Mitwirkung von Gitterschwingungen) erfolgenden „direkten“ Übergänge gehorchen theoretisch folgendem Zusammenhang zwischen Absorptionskonstante α und Lichtquantenenergie E :

$$\alpha(\omega) = 0 \quad \text{für} \quad E = \hbar\omega < \hbar\omega_0$$

$$\alpha(\omega) \approx \text{const}(\omega - \omega_0)^{\frac{1}{2}} \quad \text{für} \quad E = \hbar\omega \geq \hbar\omega_0.$$

Dabei gilt für die sog. Kantenfrequenz ω_0

$$\hbar\omega_0 = E_{\text{gap}} = E_c(k=0) - E_v(k=0).$$

Diesen von der Theorie in ihrer einfachsten Form gelieferten Verlauf wird man experimentell kaum unverfälscht finden können, weil die zugrunde liegenden Band-Band-Übergänge noch in irgendeiner Weise gestört werden, sei es durch Phononen oder Exzitonen — also Störungen

* Neue Adresse: IBM-Deutschland, VTB-Behörden AE, Bad Godesberg, Stephan-Lochner-Straße.

¹ REDFIELD, D.: Phys. Rev. **130**, 914, 916 (1963).

der exakten räumlichen Periodizität in der Anordnung der Bausteine des Kristallgitters — sei es durch den Einfluß von magnetischen oder von äußeren oder inneren elektrischen Feldern. Eine theoretisch interessante und auch experimentell gut zugängliche Beeinflussung des Absorptionsmechanismus geschieht durch ein elektrisches Feld. Seit 1958 sind zu diesem Thema nach den ersten theoretischen Arbeiten von FRANZ² und KELDYSH³ inzwischen zahlreiche theoretische und experimentelle Arbeiten ausgeführt worden.

FRANZ behandelt in seiner grundlegenden Arbeit den Fall parabolischen $E(k)$ -Verlaufs bei direkten Übergängen und findet für das auf der langwelligen Seite liegende Gebiet vor der Kantenfrequenz ω_0 , wo nach der einfachen Theorie keine Absorption auftreten sollte, rechnerisch bei Einwirkung eines äußeren elektrischen Feldes eine Absorption. In einem weiteren Schritt berücksichtigt FRANZ durch einen rein phänomenologischen Ansatz die experimentell sehr häufig festgestellte Tatsache, daß die Absorptionskonstante an der Bandkante nicht entsprechend der Wurzel aus $\omega - \omega_0$, sondern exponentiell zunimmt. FRANZ findet in diesem Fall, daß die durch das äußere Feld hervorgerufene Zusatzabsorption weit vor der Kante ($\omega \ll \omega_0$) quadratisch mit der im Kristall wirksamen Feldstärke anwächst. CALLAWAY^{4,5} behandelt von „first principles“ ausgehend den Einfluß eines elektrischen Feldes auf die Absorptionskonstante eines Kristalls. Nur als Beispiel nimmt er als zusätzliche Voraussetzung den parabolischen Bandverlauf, Valenzbandmaximum und Leitungsbandminimum beide für $k=0$ sowie ein schwaches äußeres elektrisches Feld an. Unter diesen speziellen Annahmen gelangt er seinerseits wie THARMALINGAM⁶ mit der Effektiven-Massen-Näherung zum gleichen analytischen Ausdruck für die Absorptionskonstante.

FRITSCHÉ⁷ unterzieht die in der Callawayschen Theorie vorgenommenen Grenzübergänge einer kritischen Betrachtung. PENCHINA⁸ und YACOBY⁹ endlich berücksichtigen in ihren Rechnungen von Anfang an auch die indirekten Übergänge.

Schließlich berechnen SERAPHIN und BOTTKA^{10,11} mit Hilfe der Dispersionsrelationen den spektralen Verlauf der durch den Franz-

² FRANZ, W.: Z. Naturforsch. **13a**, 484 (1958).

³ KELDYSH, L. V.: Zhur. Eksp. i Teoret. Fiz. **34**, 1138 (1958); Engl. Übers. in Soviet Phys. JETP **7**, 788 (1958).

⁴ CALLAWAY, J.: Phys. Rev. **130**, 549 (1963).

⁵ CALLAWAY, J.: Phys. Rev. **134 A**, 998 (1964).

⁶ THARMALINGAM, K.: Phys. Rev. **130**, 2204 (1963).

⁷ FRITSCHÉ, L.: Phys. Stat. Sol. **13**, 487 (1966).

⁸ PENCHINA, C. M.: Phys. Rev. **138 A**, 924 (1965).

⁹ YACOBY, Y.: Phys. Rev. **140 A**, 263 (1965).

¹⁰ SERAPHIN, B. O., and N. BOTTKA: Phys. Rev. **139 A**, 560 (1965).

¹¹ SERAPHIN, B. O., and N. BOTTKA: Phys. Rev. **145**, 628 (1966).

Keldysh-Effekt mittelbar über die Absorptionsänderung hervorgerufenen Reflexionsänderung für beliebige Band-Band-Übergänge.

Experimentell folgen den ersten noch rein qualitativen Beobachtungen von BÖER, KÜMMEL und HÄNSCH¹² an CdS Untersuchungen von WILLIAMS^{13,14}, der eine quadratische Abhängigkeit der Absorptionsänderung von der Feldstärke ebenfalls an CdS sowie an HgJ₂ und PbJ₂ feststellt. MOSS¹⁵ findet den gleichen Zusammenhang an GaAs.

Während die bislang genannten experimentellen Arbeiten lediglich über monotone Änderungen der Absorptionskonstante mit der Frequenz berichten, wird durch LENZ und MOLLWO¹⁶ erstmals eine spektrale Selektivität für indirekte Übergänge in Silizium nachgewiesen (im Gegensatz zu Arbeiten von VAVILOV und BRITSYN¹⁷).

Diese Ergebnisse werden durch CHESTER und WENDLAND¹⁸ an Silizium und FROVA und HANDLER¹⁹⁻²¹ an Germanium und Silizium bestätigt und wesentlich verfeinert. Die letzte experimentell sehr sorgfältige Arbeit über indirekte Übergänge in Silizium stammt von YACOBY²². Es gelingt ihm, die von der Theorie geforderten periodischen Schwankungen der Absorptionsänderungen für Frequenzen größer als die Kantenfrequenz zu messen, zahlreiche Selektivitäten festzustellen und diese Übergängen zuzuordnen, die unter Mitwirkung von Phononen vor sich gehen.

Für die direkten Übergänge hat man bei Silizium die Ergebnisse von FROVA und HANDLER²¹, für GaAs diejenigen von LAMBERT²³ und von PAIGE und REES²⁴. Dabei werden die theoretisch zu erwartenden Selektivitäten und Abhängigkeiten gefunden. Für Frequenzen höher als die Bandkantenfrequenz liegen vor allem zahlreiche Reflexionsuntersuchungen von SERAPHIN u. Mitarb. vor, die zusammen mit ihren oben erwähnten theoretischen Arbeiten Aufschlüsse über den Verlauf energetisch hoch liegender Bänder liefern.

In allen genannten Arbeiten berücksichtigt die theoretische Behandlung folgende Störungen des Idealkristalls:

¹² BÖER, K. W., U. KÜMMEL u. H. J. HÄNSCH: Z. Physik **155**, 170 (1959).

¹³ WILLIAMS, R.: Phys. Rev. **117**, 1487 (1960).

¹⁴ WILLIAMS, R.: Phys. Rev. **126**, 442 (1962).

¹⁵ MOSS, T. S.: J. Appl. Phys. **32**, 2136 (1961).

¹⁶ LENZ, J., u. E. MOLLWO: Z. Physik **176**, 536 (1963).

¹⁷ VAVILOV, V. S., i K. I. BRITSYN: Fiz. Tverdogo Tela **2**, 1937 (1960); **3**, 2497 (1962); Engl. Übers. in Soviet Phys.-Solid State **2**, 1746 (1961); **3**, 1816 (1962).

¹⁸ CHESTER, M., and P. H. WENDLAND: Phys. Rev. Letters **13**, 193 (1964).

¹⁹ FROVA, A., and P. HANDLER: Phys. Rev. **137** A, 1857 (1965).

²⁰ FROVA, A., and P. HANDLER: Appl. Phys. Letters **5**, 1, 11 (1964).

²¹ FROVA, A., and P. HANDLER: Phys. Rev. Letters **14**, 178 (1965).

²² YACOBY, Y.: Phys. Rev. **142**, 445 (1966).

²³ LAMBERT, L. M.: J. Phys. Chem. Solids **26**, 1409 (1965).

²⁴ PAIGE, E. G. S., and H. D. REES: Phys. Rev. Letters **16**, 444 (1966).

Photonen, Phononen und ein statisches, äußeres elektrisches Feld. REDFIELD¹ weist darauf hin, daß auch die durch Störstellen im Kristallinneren auftretenden elektrischen Felder bei der theoretischen Behandlung der Lichtabsorption durch Kristalle berücksichtigt werden müssen.

In der vorliegenden Arbeit wird dieser der semiquantitativen Rechnung REDFIELDS zugrunde liegende Gedanke wieder aufgegriffen und aufbauend auf der Callawayschen Theorie rechnerisch durchgeführt. Der Verlauf der Absorptionskonstanten für direkte Übergänge wird unabhängig von speziellen Materialkonstanten berechnet und dargestellt. Außerdem wird für den Fall, daß die Stärke des äußeren Feldes klein gegenüber der Stärke der inneren Felder ist, eine allgemeingültige Darstellung der Änderung der Absorptionskonstanten durch ein äußeres Feld berechnet. Sie ergibt sich unter der genannten Voraussetzung bei allen Quantenenergien als proportional dem Quadrat der Feldstärke des äußeren elektrischen Feldes.

Der Franzeffekt an der idealen Absorptionskante

Nach CALLAWAY^{4,5} lautet der Ausdruck für die Absorption eines Halbleiterkristalls von ungestörter Gitterperiodizität unter dem Einfluß eines „schwachen“ elektrischen Gleichfeldes $\mathcal{E}$.

$$\alpha(\omega, \mathcal{E}) = \frac{2\pi}{n\omega} \cdot K \cdot \mu \cdot \left(\frac{2\mu e \mathcal{E}}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \int_{\frac{E_{gap} - \hbar\omega}{\hbar\omega_F}}^{\infty} A i^2(\eta) d\eta \quad (1)$$

mit

$$K = \frac{2e^2 |e \cdot p_{cv}|^2}{\pi \cdot \hbar^2 m^2 \varepsilon_0 c}, \quad \mu = \frac{\mu_c \cdot \mu_v}{\mu_c + \mu_v}, \quad \omega_F = \left(\frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2\mu \hbar} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

ω_F bezeichnet man als die „Franzfrequenz“. Sie hängt von der Feldstärke $\mathcal{E}$ und von der effektiven Masse μ ab. Man spricht dann von einem „schwachen“ $\mathcal{E}$ -Feld, wenn für die Kristallelektronen die Potentialänderung im Bereich einer Gitterperiode, hervorgerufen durch das Gleichfeld, sehr gering ist gegenüber der Variation des Atompotentials der Gitterbausteine. Die Bedeutung der Buchstaben $e, m, \hbar, c, \varepsilon_0, \pi$ ist die übliche, $e \cdot p_{cv}$ ist die Komponente des Matricelements des optischen Übergangs in Polarisationsrichtung der Lichtwelle, μ bezeichnet die effektive Masse, n die Brechzahl des Halbleiters bei der betrachteten Lichtfrequenz ω . Mit dem Funktionssymbol Ai bezeichnet man die Airyfunktion. Sie wird z. B. durch folgendes Integral definiert:

$$Ai(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos \left\{ \frac{s^3}{3} + zs \right\} ds.$$

Man kann sie durch drittelzahlige gewöhnliche (J) und modifizierte (I, K) Besselfunktionen darstellen:

$$\text{Ai}(z) = \begin{cases} \frac{1}{3} \sqrt{z} [I_{-\frac{1}{3}}(\frac{2}{3} z^{\frac{1}{3}}) - I_{+\frac{1}{3}}(\frac{2}{3} z^{\frac{1}{3}})] & \text{für } z \geq 0 \\ \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{z}{3}} K_{\frac{1}{3}}(\frac{2}{3} z^{\frac{1}{3}}) & \\ \frac{1}{3} \sqrt{-z} [J_{-\frac{1}{3}}(\frac{2}{3} |z|^{\frac{1}{3}}) + J_{+\frac{1}{3}}(\frac{2}{3} |z|^{\frac{1}{3}})] & \text{für } z \leq 0. \end{cases}$$

Auch das Integral

$$\int_{y_0}^{\infty} \text{Ai}^2(\eta) d\eta$$

läßt sich exakt ausführen und kann entweder durch die Airyfunktion und deren Ableitung oder ebenfalls wieder durch Besselfunktionen dargestellt werden. Es ergibt sich:

$$\begin{aligned} \int_{y_0}^{\infty} \text{Ai}^2(\eta) d\eta &= \left[\frac{d}{d\eta} \text{Ai}(\eta) \Big|_{y_0} \right]^2 - y_0 \text{Ai}^2(y_0) \\ &= \begin{cases} \frac{y_0^2}{9} [(I_{-\frac{1}{3}}(\xi) - I_{\frac{1}{3}}(\xi))^2 - (I_{-\frac{1}{3}}(\xi) - I_{\frac{1}{3}}(\xi))^2] & \text{für } y_0 \geq 0 \\ \frac{y_0^2}{3\pi^2} [K_{\frac{1}{3}}^2(\xi) - K_{\frac{1}{3}}^2(\xi)] & \\ \frac{y_0^2}{9} [(J_{-\frac{1}{3}}(\xi) - J_{\frac{1}{3}}(\xi))^2 + (J_{\frac{1}{3}}(\xi) + J_{-\frac{1}{3}}(\xi))^2] & \text{für } y_0 \leq 0 \end{cases} \quad (1a) \end{aligned}$$

$$\text{mit } \xi = \frac{2}{3} |y_0|^{\frac{1}{3}};$$

speziell ist

$$\int_0^{\infty} \text{Ai}^2(\eta) d\eta = \frac{1}{\sqrt[3]{9} (\Gamma(\frac{1}{3}))^2}.$$

Setzt man diese ausgewerteten Integrale in die Callawaysche Formel (1) für die Absorption α ein, dann erhält man einen analytischen Ausdruck für $\alpha = \alpha(\omega, \mathcal{E})$; in der Grenze $\mathcal{E} \rightarrow 0$ geht $|y_0| \rightarrow \infty$, also $\xi \rightarrow \infty$, wenn $\hbar\omega \neq E_{\text{gap}}$. Dann darf man für die Besselfunktionen die asymptotischen Formeln anwenden, sie also durch Kreisfunktionen ersetzen; mit den Additionstheoremen der Kreisfunktionen gelangt man dann nach einigen Umformungen zu:

$$\alpha(\omega) = \begin{cases} 0 & \text{für } \omega < \omega_0 \\ \frac{K \cdot (2\mu)^{\frac{1}{2}}}{\hbar \omega \cdot n} \cdot (\hbar\omega - E_{\text{gap}})^{\frac{1}{2}} & \text{für } \omega \geq \omega_0; \end{cases} \quad (1b)$$

hierbei ist $\hbar\omega_0 = E_{\text{gap}}$.

Wie zu erwarten, liefert Formel (1) bei verschwindendem äußeren Feld die ideale Absorptionskante. Außerdem zeigt sie uns die Wirkung eines äußeren elektrischen Feldes auf die Kante, wenn man $\Delta\alpha = \alpha(\omega, \mathcal{E}) - \alpha(\omega)$ bildet.

Die durch innere Felder modifizierte Absorptionskante

Es ist naheliegend, Formel (1) nicht nur auf ein äußeres Feld $\mathcal{E}$ sondern auch auf die durch Störstellen innerhalb eines Kristalls hervorgerufenen inneren elektrischen Felder anzuwenden. Die innere Feldstärke F_i ist dabei keine räumlich konstante Größe, sondern vom Ort innerhalb des Kristalls abhängig. Dementsprechend wäre dann auch $\alpha(\omega, F_i)$ wegen $F_i = F_i(r)$ ortsabhängig. Dieses lokale α ist aber einer Messung nicht zugänglich. Das gemessene α setzt begrifflich immer ein Meßvolumen voraus und ergibt sich als Mittelwert aller lokalen α -Werte innerhalb des Meßvolumens. Für quantitative Betrachtungen muß man Annahmen über die Wahrscheinlichkeitsverteilung der inneren elektrischen Feldstärke F_i machen. Hier schließen wir uns den Darlegungen REDFIELDS¹ an. Bei unseren Überlegungen benutzen wir das Bändermodell und beschränken uns auf direkte Übergänge; die effektiven Massen werden als skalare Konstanten angenommen; Valenzbandmaximum und Leitungsbandminimum mögen im k -Raum an der gleichen Stelle liegen. Wir begnügen uns mit der Näherung, einen parabolischen $E(k)$ -Verlauf anzunehmen. Wenn man — wie in ¹ näher begründet wird — annimmt, daß das innere Feld an einer herausgegriffenen Stelle des Kristalls im wesentlichen immer nur durch die nächstgelegene Störstelle bedingt ist, so erhält man für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der inneren elektrischen Feldstärke F_i

$$w(F_i) dF_i = \frac{3}{2} \left(\frac{F_0}{F_i} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \exp \left\{ - \left(\frac{F_0}{F_i} \right)^{\frac{3}{2}} \right\} \frac{dF_i}{F_0} \quad (2)$$

mit

$$F_0 = \frac{1}{4\pi \epsilon \epsilon_0} \cdot \frac{e}{r_0^2}; \quad r_0 = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi} N^{-1}}, \quad (2a)$$

wobei N die Konzentration der einfach geladenen Störstellen ist.

Statt nach der Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Feldstärke F_i kann man auch nach der Wahrscheinlichkeit fragen, daß ein willkürlich aus dem Kristall herausgegriffener Punkt P im Abstand r von der nächstgelegenen Störstelle liegt. Das ist nur eine andere Deutung der Formel (2); denn wegen $F_i \propto 1/r^2$ gilt

$$\frac{F_0}{F_i} = \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \stackrel{\text{def}}{=} \rho^2; \quad \text{mit} \quad \Phi \stackrel{\text{def}}{=} \frac{F_i}{F_0}$$

kann man (2) umschreiben in

$$w(\Phi) d\Phi = \frac{3}{2} \Phi^{-\frac{3}{2}} \exp \{ -\Phi^{-\frac{3}{2}} \} d\Phi \quad (2b)$$

oder mit $\rho^2 = \Phi^{-1}$ in

$$w(\rho) d\rho = 3\rho^2 \exp\{-\rho^3\} d\rho = \exp\{-\rho^3\} d\rho^3. \quad (2c)$$

In Analogie zum Redfieldschen Verfahren müßten wir nun folgendes Integral berechnen:

$$\alpha_{\text{Redfield}}(\omega) = \frac{2\pi}{n\omega} \cdot K \cdot \mu \cdot \left(\frac{2\mu e}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \int_{F_i/F_0=0}^{\infty} \frac{3}{2} \left(\frac{F_0}{F_i}\right)^{\frac{2}{3}} \exp\left\{-\left(\frac{F_0}{F_i}\right)^{\frac{2}{3}}\right\} F_i^{\frac{1}{3}} \int_{y_0}^{\infty} \text{Ai}^2(\eta) d\eta d\frac{F_i}{F_0} \quad (3)$$

mit

$$y_0 = \frac{E_{\text{gap}} - \hbar\omega}{\hbar \sqrt[3]{\frac{e^2 F_i^2}{2\mu\hbar}}} \quad \text{und} \quad \frac{3}{2} \left(\frac{F_0}{F_i}\right)^{\frac{2}{3}} \exp\left\{-\left(\frac{F_0}{F_i}\right)^{\frac{2}{3}}\right\} d\frac{F_i}{F_0} = w(\Phi) d\Phi.$$

Wir werten dieses Integral nicht numerisch aus, weil noch manche Konstanten als Parameter eingehen: z. B. F_0 , E_{gap} , μ . Es wird sich zeigen, daß man durch geeignete Wahl von Bezugsgrößen das Integral allgemein auswerten und zeichnerisch darstellen kann. Wählt man nämlich

$$\omega_{F_0} = \sqrt[3]{\frac{e^2 F_0^2}{2\mu\hbar}}$$

als Frequenzmaß, dann geht die Untergrenze des inneren Integrals über in

$$\frac{E_{\text{gap}} - \hbar\omega}{\hbar\omega_{F_0}} \cdot \sqrt[3]{\frac{F_0}{F_i}} \frac{2}{dF_i} - p \cdot \sqrt[3]{\frac{F_0}{F_i}} = -p \cdot \rho^{\frac{2}{3}}.$$

Damit geht (3) über in

$$\alpha_{\text{Redfield}}(p) = \frac{2\pi}{n\omega} \cdot K \cdot \mu \cdot \left(\frac{2\mu e F_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \int_{\rho=0}^{\infty} \exp\{-\rho^3\} \cdot 3\rho^{\frac{2}{3}} \int_{-p \cdot \rho^{\frac{2}{3}}}^{\infty} \text{Ai}^2(\eta) d\eta d\rho. \quad (3a)$$

Die Konstanten F_0 und μ stehen jetzt in den Faktoren vor dem interessierenden Doppelintegral, $E_{\text{gap}} = \hbar\omega_0$ entspricht nun dem Nullpunkt der p -Skala. Um auch noch sämtliche vor dem Doppelintegral stehenden Faktoren zum Zwecke der zeichnerischen Darstellung zu eliminieren, bildet man als neue Größe die relative Absorptionskonstante

$$\tilde{\alpha}_{\text{df}} = \frac{\alpha_{\text{Redfield}}(p)}{\alpha_{\text{Redfield}}(0)} \approx \frac{\alpha \cdot \omega \cdot n}{\alpha_0 \cdot \omega_0 \cdot n_0}.$$

Wir werden später auf diese Definition zurückgreifen.

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der elektrischen Feldstärke bei Überlagerung von inneren Feldern und äußerem Gleichfeld

Legt man zusätzlich zu den inneren Feldern noch ein äußeres elektrisches Gleichfeld F an, so ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung neu zu berechnen. Zweckmäßigerweise führt man hierzu eine relative Größe

$$\gamma = \frac{F}{F_0}$$

ein.

Wie bisher bezeichnen wir das im Inneren des Kristalls wirksame Feld mit Φ ; nur ist jetzt Φ nicht mehr das innere Feld alleine, sondern die Überlagerung von innerem und äußerem Felde. Das innere Feld alleine bezeichnen wir ab jetzt mit $\tilde{\Phi}$. Es gilt $\tilde{\Phi} + \gamma = \Phi$; das äußere Feld überlagert sich vektoriell den von Störstellen erzeugten Coulombfeldern; dabei ziehen wir wieder nach ¹ nur die nächstliegende Störstelle in Betracht und vernachlässigen die Wirkung der übrigen wegen der aus der Elektroneutralität des Gesamtkristalls resultierenden Abschirmung. Mit $\tilde{\Phi}$ als innerem, γ als äußerem und Φ als resultierendem Feld (in relativen Einheiten) gilt die Beziehung

$$\Phi(\rho, \vartheta) = (\gamma^2 + \tilde{\Phi}^2 + 2\gamma \tilde{\Phi} \cos \vartheta)^{\frac{1}{2}},$$

wobei ϑ den Winkel zwischen $\tilde{\Phi}$ und γ bezeichnet.

Wir fragen nun nach der Häufigkeit des Auftretens einer willkürlich herausgegriffenen Feldstärke Φ_1 in der Menge aller $\Phi(\rho, \vartheta)$. Das Gleichfeld γ hat auf die Wahrscheinlichkeit $w(\rho) d\rho$ für das Auftreten einer Entfernung ρ eines willkürlich herausgegriffenen, aber festgehaltenen Ortes von der nächsten Störstelle keinen Einfluß. Die gesuchte Häufigkeitsverteilung $w_\gamma(\Phi_1)$ erhält man durch Mittelung mit der Gewichtsfunktion $w(\rho) d\rho$ über den vollen Raumwinkel und über alle Abstände ρ . Dabei ist stets die Bedingung $\Phi^2 = \gamma^2 + \tilde{\Phi}^2 + 2\gamma \tilde{\Phi} \cos \vartheta$ zu erfüllen:

$$w_\gamma(\Phi_1) = \frac{1}{4\pi} \int_{\vartheta=0}^{\pi} 2\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_{\rho=0}^{\infty} \delta(\Phi_1 - \Phi) \exp(-\rho^3) d\rho^3.$$

Man summiert also über alle Abstände ρ und alle Winkel ϑ gewichtet mit der Häufigkeit ihres Auftretens, und schneidet mit der Diracschen Deltafunktion genau diejenigen Punkte des Raumes heraus, wo das aus der Überlagerung resultierende Feld Φ den speziellen, willkürlich herausgegriffenen Wert Φ_1 hat. Zur weiteren Auswertung setzt man $\cos \vartheta = u$:

$$w_\gamma(\Phi_1) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} du \int_{\rho=0}^{\infty} \delta(\Phi_1 - \Phi) \exp\{-\rho^3\} d\rho^3 \quad \text{mit} \quad \Phi^2 = \gamma^2 + \frac{1}{\rho^4} + 2 \frac{\gamma \cdot u}{\rho^2}.$$

Nun geht man von einer Integration über u zu einer Integration über Φ über:

$$w_{\gamma}(\Phi_1) = \frac{3}{2\gamma} \int_0^{\infty} d\rho \rho^4 \exp\{-\rho^3\} \int_{|\gamma-\rho^{-2}|}^{\gamma+\rho^{-2}} d\Phi \Phi \delta(\Phi_1 - \Phi).$$

In Fig. 1 ist der Integrationsbereich in der Φ - ρ -Ebene schraffiert gezeichnet. Wegen der δ -Funktion liefert der Integrand jedoch nur für $\Phi = \Phi_1$ einen von 0 verschiedenen Beitrag, so daß man das Integral über

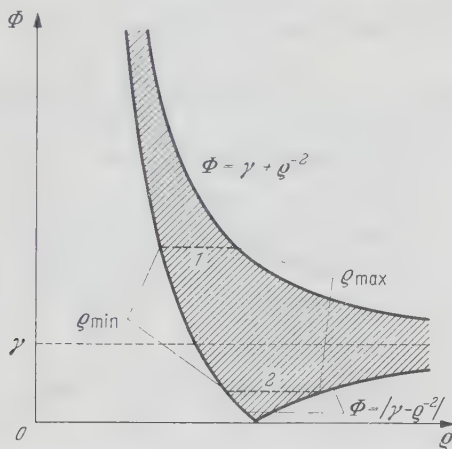


Fig. 1. Der Zusammenhang zwischen der im Inneren des Kristalls herrschenden, durch Überlagerung von inneren und äußeren Feldern zustandekommenden Feldstärke $|\Phi|$ und dem Abstand ρ von der nächsten Störstelle. (Φ , ρ in relativen Einheiten).

Nur die nächstgelegene Störstelle wird berücksichtigt

ρ nur längs der gestrichelt eingezeichneten Geraden 1 für $\Phi_1 > \gamma$ bzw. 2 für $\Phi_1 < \gamma$ zu erstrecken hat. Nach Ausführung des Integrals über die Delta-Funktion ergibt sich

$$w_{\gamma}(\Phi_1) = \frac{3\Phi_1}{2\gamma} \int d\rho \rho^4 \exp\{-\rho^3\},$$

wobei die Integrationsgrenzen aus Fig. 1 abzulesen sind. Die untere Grenze $\rho_{\min}$ wird einheitlich bestimmt durch

$$\Phi_1 = \rho_{\min}^{-2} - \gamma, \quad \text{d.h.} \quad \rho_{\min} = (\Phi_1 + \gamma)^{-\frac{1}{2}}.$$

Zur Bestimmung der oberen Grenze ist eine Fallunterscheidung erforderlich. Für $\Phi_1 > \gamma$ (Gerade 1) ist

$$\Phi_1 = \rho_{\max}^{-2} + \gamma, \quad \text{d.h.} \quad \rho_{\max} = (\Phi_1 - \gamma)^{-\frac{1}{2}}$$

und für $\Phi_1 < \gamma$ (Gerade 2)

$$\Phi_1 = \gamma - \rho_{\max}^{-2}, \quad \text{d. h.} \quad \rho_{\max} = (\gamma - \Phi_1)^{-\frac{1}{2}}.$$

In jedem Falle finden wir also die durch das äußere Gleichfeld modifizierte Wahrscheinlichkeitsverteilung der resultierenden Feldstärke Φ als

$$w_\gamma(\Phi) = \frac{3}{2} \frac{\Phi^{|\Phi-\gamma|^{-\frac{1}{2}}}}{\gamma^{(\Phi+\gamma)^{-\frac{1}{2}}}} \rho^4 \exp\{-\rho^3\} d\rho. \quad (4)$$

(Der Index 1 an Φ_1 wurde wieder weggelassen).

Dieses Integral kann man für kleine γ entwickeln und findet:

$$\begin{aligned} w_\gamma(\Phi) = & \frac{3}{2} \left(\frac{1}{\Phi}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left[-\left(\frac{1}{\Phi}\right)^{\frac{3}{2}}\right] \\ & \cdot \left\{ 1 + \gamma^2 \left[2,625 \left(\frac{1}{\Phi}\right)^2 - 2,375 \left(\frac{1}{\Phi}\right)^{3,5} \right. \right. \\ & \left. \left. + 0,375 \left(\frac{1}{\Phi}\right)^5 \right] + \gamma^4 [\dots] + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (4a)$$

Bei der Diskussion dieser Entwicklung bemerkt man:

1. $w_\gamma(\Phi) = w(\Phi) \cdot \{1 + \gamma^2 [\dots] + \gamma^4 [\dots] + \dots\}$.
2. Bis zur Entwicklung in γ^2 ist auch die Funktion $w_\gamma(\Phi)$ noch richtig normiert; denn

$$\int_{\Phi=0}^{\infty} w(\Phi) \left[2,625 \left(\frac{1}{\Phi}\right)^2 - 2,375 \left(\frac{1}{\Phi}\right)^{3,5} + 0,375 \left(\frac{1}{\Phi}\right)^5 \right] d\Phi = 0.$$

Näherungsweise ergibt sich die modifizierte Wahrscheinlichkeitsverteilung aus der ursprünglichen durch Zusatz eines vom Quadrat der äußeren Feldstärke linear abhängenden Gliedes. Die Entwicklung enthält nur Glieder in geradzahligem Potenzen von γ . Diskutiert man den multiplikativ zu γ^2 hinzutretenden Faktor, so stellt man zwei Nullstellen, nämlich für

$$\left(\frac{1}{\Phi}\right)^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{6} (19 \pm \sqrt{109})$$

fest. Durch Differenzieren des Faktors und Nullsetzen des Differentialquotienten findet man das Minimum bei

$$\left(\frac{1}{\Phi}\right)^{\frac{3}{2}} = 3,67.$$

Der Wert des Faktors am Minimum ist $-5,86$. Eine Wahrscheinlichkeitsverteilung ist aber definitionsgemäß eine positiv semidefinite Funktion. Das muß selbst im Minimum des Zusatzes gelten, also:

$$1 - \gamma^2 \cdot 5,86 \geq 0;$$

daraus folgt für γ eine Beschränkung nach oben: $\gamma \leq 0,414$. Nur wenn γ deutlich unter diesem Wert bleibt, ist die Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung bis zu γ^2 nicht schon von vornherein falsch. Für größere γ müßten noch die Glieder in γ^4 , γ^6 usw. berücksichtigt werden.

Der Einfluß der inneren Coulombfelder auf die Absorptionskonstante als Funktion der Frequenz und die Modifizierung dieses Einflusses durch ein von außen angelegtes elektrisches Gleichfeld

In Strenge müßten wir die Formel für die Absorptionskonstante in Abhängigkeit eines Feldes (CALLAWAY, THARMALINGAM) mit der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Feldstärke bei Zusammenwirken eines inneren und äußeren Feldes über alle Feldstärken mitteln; das wäre folgender Ausdruck:

$$\alpha(p, \gamma) = \frac{2\pi}{n \cdot \omega} \cdot K \cdot \mu \cdot \left(\frac{2\mu e F_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{\Phi=0}^{\infty} w_{\gamma}(\Phi) \Phi^{\frac{1}{2}} \int_{-p \cdot \Phi^{-\frac{1}{2}}}^{\infty} \text{Ai}^2(\eta) d\eta d\Phi.$$

[Siehe Gl. (1), (4), (4a)!]

Die Auswertung wurde unter Zugrundelegung der für kleine äußere Feldstärken gültigen Näherung (4a) numerisch durchgeführt.

Da nach Formel (4a) $w_{\gamma}(\Phi)$ sich näherungsweise durch einen von γ unabhängigen und einen von γ^2 abhängigen Summanden darstellen läßt, kann man ebenso auch $\alpha(p, \gamma)$ in zwei Terme zerlegen: nämlich in den von γ unabhängigen „Redfieldterm“ und den linear von γ^2 abhängigen Term der feldabhängigen Zusatzabsorptionskonstante. Bei der kurvenmäßigen Darstellung wird in Fig. 2 der Redfieldterm als $\tilde{\alpha}$ (vgl. S. 436) logarithmisch derart aufgetragen, daß die Absorptionskonstante an der Kante auf 1 normiert ist. In Fig. 3 ist die Zusatzabsorptionskonstante so normiert aufgetragen, daß sie jeweils durch γ^2 und die zur gleichen Frequenz gehörige Absorptionskonstante ohne äußeres Feld dividiert ist:

$$\alpha(p, \gamma) = \alpha_{\text{Redfield}}(p) \cdot [1 + \gamma^2 \cdot \varepsilon(p)]$$

bzw.

$$\Delta \alpha(p, \gamma) = \gamma^2 \cdot \alpha_{\text{Redfield}}(p) \cdot \varepsilon(p).$$

Die Auswertung liefert in der Nähe von $p=0$ nicht nur numerisch berechenbare Werte für α_{Redfield} und $\varepsilon(p)$, sondern für $p=0$ analytische

Ausdrücke für Wert und Steigung von $\alpha_{\text{Redfield}}(p) \cdot [1 + \gamma^2 \cdot \varepsilon(p)]$:

$$\alpha(0, \gamma) = \text{const} \cdot F_0^{\frac{1}{3}} \frac{1}{3^{\frac{1}{3}} (\Gamma(\frac{1}{3}))^2} \left[\Gamma\left(\frac{7}{9}\right) + \gamma^2 \frac{20}{2187} \Gamma\left(\frac{1}{9}\right) \right]$$

$$\varepsilon(0) = \left(20 \cdot \Gamma\left(\frac{1}{9}\right) \right) / \left(2187 \cdot \Gamma\left(\frac{7}{9}\right) \right)$$

$$\left. \frac{d}{dp} \alpha(p, \gamma) \right|_{p=0} = \text{const} \cdot F_0^{\frac{1}{3}} \frac{1}{3^{\frac{1}{3}} (\Gamma(\frac{2}{3}))^2} \left[\Gamma\left(\frac{11}{9}\right) - \gamma^2 \frac{70}{2187} \Gamma\left(\frac{5}{9}\right) \right].$$

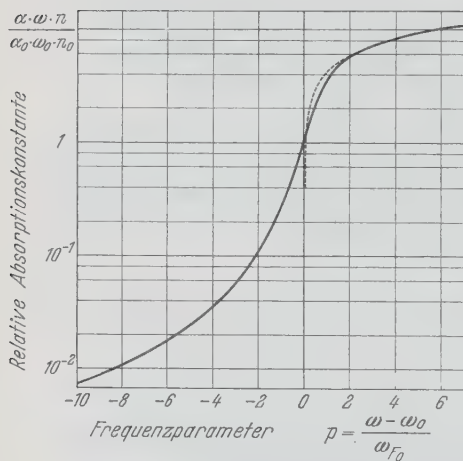


Fig. 2

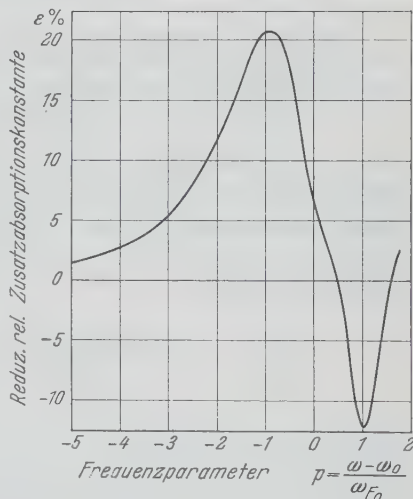


Fig. 3

Fig. 2. Der Verlauf der Absorptionskante eines Halbleiters mit parabolischen Energiebändern (Extremwerte $E_{c,\min}$ bzw. $E_{v,\max}$ im k -Raum für $k=0$) in der durch innere Felder modifizierte Gestalt. $\frac{\alpha_{\text{Redfield}} \cdot \omega \cdot n}{\alpha_{\text{Redfield}}(0) \cdot \omega_0 \cdot n_0}$ (ausgezogene Kurve). Dieser Ausdruck ist für große p proportional $\sqrt{\omega - \omega_0}$. Die gestrichelte Kurve stellt die Extrapolation dieser Wurzelabhängigkeit bis zu $p \rightarrow 0$ dar. Das ist der Verlauf der reduzierten idealen Kante: $\frac{\alpha_{\text{ideal}} \cdot \omega \cdot n}{\alpha_{\text{Redfield}}(0) \cdot \omega_0 \cdot n_0}$. (Frequenz und Absorptionskonstante in relativen Einheiten)

Fig. 3. Spektraler Verlauf der durch ein äußeres Feld bewirkten Zusatzabsorption (in relativen Einheiten). Die gesamte Absorption ist bei Anlegen einer Spannung gleich $\alpha(p, \gamma) = \alpha(p)(1 + \gamma^2 \cdot \varepsilon(p))$; $\gamma = F/F_0$

Für $\gamma=0$ erhält man daraus

$$\left(\frac{1}{\alpha_{\text{Redfield}}} \cdot \frac{d\alpha_{\text{Redfield}}}{dp} \right)_{p=0} = \frac{\Gamma(\frac{11}{9}) \cdot \Gamma^2(\frac{1}{3}) \cdot 3^{\frac{1}{3}}}{\Gamma(\frac{7}{9}) \cdot \Gamma^2(\frac{2}{3}) \cdot 3^{\frac{1}{3}}} = 1,443.$$

Wenn man beispielsweise die „Kantensteilheit“

$$\lambda = \left(\frac{1}{\alpha} \frac{d\alpha}{d\omega} \right)_{\omega=\omega_0} = \left(\frac{1}{\alpha_{\text{Redfield}}} \frac{d\alpha_{\text{Redfield}}}{dp} \right)_{p=0} \cdot \frac{1}{\omega_{F_0}} = \frac{1,443}{\omega_{F_0}}$$

experimentell bestimmt, hätte man damit eine Möglichkeit, die Redfield'sche Theorie experimentell zu überprüfen, bzw. nachzusehen, welcher Anteil der Kantensteilheit durch die inneren Felder verursacht wird. Man kann allgemein sagen, daß $\alpha(p, \gamma)$ für große p und jedes γ dieselbe Absorption liefert wie die ideale Absorptionskante: Es gilt

$$\text{Ai}(-u)_{u \rightarrow \infty} \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt[4]{u}} \left(\cos \frac{2}{3} u^{\frac{3}{2}} + \sin \frac{2}{3} u^{\frac{3}{2}} \right)$$

sowie

$$\text{Ai}'(-u)_{u \rightarrow \infty} \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \sqrt[4]{u} \left(\cos \frac{2}{3} u^{\frac{3}{2}} - \sin \frac{2}{3} u^{\frac{3}{2}} \right);$$

für $u \rightarrow \infty$ hat man daher:

$$\int_{-u}^{\infty} \text{Ai}^2(\eta) d\eta = \text{Ai}'^2(-u) + u \text{Ai}^2(-u)_{u \rightarrow \infty} \sim \frac{1}{\pi} \sqrt{u}$$

und damit

$$\begin{aligned} \alpha(p, \gamma)_{p \rightarrow \infty} &\sim \text{const} \cdot F_0^{\frac{1}{3}} \cdot \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\Phi \left\{ w_{\gamma}(\Phi) \Phi^{\frac{1}{3}} \right\} \sqrt{\frac{p}{\Phi^{\frac{2}{3}}}} \\ &= \text{const} \cdot F_0^{\frac{1}{3}} \cdot \frac{1}{\pi} \cdot \sqrt{p} = \frac{\text{const}}{\pi} \cdot \left(\frac{2\mu\hbar}{e^2} \right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{\omega - \omega_0}. \end{aligned}$$

Dies gilt speziell auch für $\gamma=0$ und jedes F_0 . Darum müssen alle Redfieldkurven für beliebige, nicht zu hohe Störstellenkonzentrationen asymptotisch in die ideale Kante einmünden, sobald nur die Frequenz hinreichend groß gewählt wird.

Vergleich der eigenen Ergebnisse mit denjenigen von Franz

Um die hier gewonnenen Resultate mit den Ergebnissen von FRANZ² zu vergleichen, sind dessen Formeln (29), (31) und (32) für den Grenzfall kleiner Felder, d. h.

$$\lambda \omega_F \ll 1,$$

zu diskutieren. Es sind hier zwei Grenzfälle zu unterscheiden:

$$1. (\omega_0 - \omega)/\omega_F \ll 1$$

(das bedeutet Absorption in unmittelbarer Umgebung der Bandkante). In diesem Fall ergibt sich aus (31) unter Berücksichtigung von (29), daß

die Zusatzabsorptionskonstante proportional der angelegten Feldstärke ist.

$$2. (\omega_0 - \omega)/\omega_F \gg 1$$

Für diesen Fall folgt aus (32) unter Berücksichtigung von (29) für die Zusatzabsorptionskonstante eine quadratische Abhängigkeit von der angelegten Feldstärke.

Fig. 4 zeigt ergänzend die Ergebnisse einer numerischen Auswertung der vollständigen Gl. (31).*

Wenn also bei der Interpretation experimenteller Ergebnisse die quadratische Feldstärkeabhängigkeit der Zusatzabsorptionskonstanten

als Bestätigung für die Franzse Theorie angesehen wird, so wird man sich zusätzlich überzeugen müssen, ob die unter 2. aufgeführte Voraussetzung erfüllt ist.

Im Gegensatz zu den Ergebnissen von FRANZ liefert unsere Rechnung für im Vergleich zu den inneren Feldern kleine äußere Felder einen konstanten Exponenten der Feldstärke $\Delta\alpha \sim F^2$. Die quadratische Feldstärkeabhängigkeit der Zusatzabsorptionskonstanten gilt für alle Quantenenergien. Es ist also nicht etwa so, daß beide Rechnungen im Grenzfall kleiner äußerer Felder zum gleichen Ergebnis kämen. Qualitativ kann man das auch einsehen, weil in unserem Falle ein kleines äußeres Feld ja lediglich einen geringen Zusatz zu einem bereits vorhandenen, verhältnismäßig großen inneren Feld darstellt. Es überrascht nicht, wenn sich folglich ein

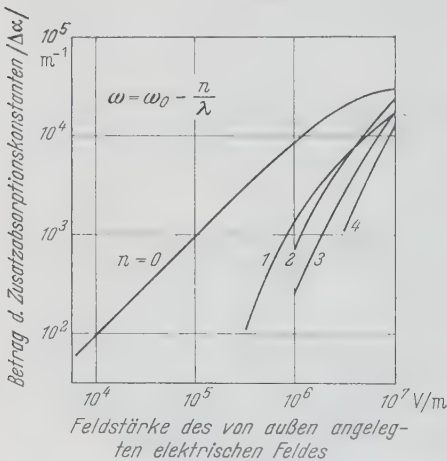


Fig. 4. Die Zusatzabsorption $\Delta\alpha$ als Funktion des äußeren elektrischen Feldes für verschiedene Frequenzen ω . Zugrunde liegt die Franzse exponentielle Absorptionskonstante mit den Daten für GaAs nach Moss¹⁵. Der Parameter n ist das Verhältnis: Frequenzabstand von der Kantenfrequenz/Frequenzintervall, in dem die Absorptionskonstante um den Faktor e abfällt

anderer Zusammenhang zwischen Feldstärke und Zusatzabsorptionskonstante ergibt als bei FRANZ. Merkwürdigerweise ist der Zusammenhang aber einfacher, obwohl wir nicht nur das äußere Feld allein berücksichtigen. Interessant ist weiterhin, daß man durch die Berücksichtigung der inneren Felder eine Verformung der idealen Absorptions-

* Die Rechnungen hat Herr O.W. MADELUNG im Rahmen seiner Diplomarbeit ausgeführt und freundlicherweise zur Verfügung gestellt.

kante erhält. Es ergibt sich nämlich zumindest in einem sehr begrenzten Frequenzbereich über etwa eine Zehnerpotenz der Absorptionskonstante hinweg ein exponentieller Zusammenhang zwischen Frequenz und Absorptionskonstante. REDFIELD¹ ist in seiner Rechnung wohl zu einem ähnlichen Ergebnis gekommen und stellte damals zur Diskussion, ob und inwieweit man die inneren Felder zur Deutung der exponentiellen Kantenform heranziehen dürfe. Unsere Kurve (Fig. 2) zeigt, daß bei dem zugrunde gelegten Modell die inneren Felder einen exponentiellen Zusammenhang über vier und mehr Zehnerpotenzen hinweg, so wie man ihn im Experiment beobachten kann, nicht verursachen können. Wenn also auch die Verformung der idealen Absorptionskante nicht allein durch innere Felder von Störstellen erklärbar sein dürfte, so muß man sie doch in Rechnung stellen, insbesondere, wenn man die Wirkung äußerer elektrischer Felder auf die Absorptionskante betrachtet.

Die Herren Professoren Dr. W. SCHULTZ, Braunschweig, und Dr. E. MOLLWO, Erlangen, widmeten mir in zahlreichen Diskussionen sehr viel Zeit. Für ihre Anregungen und kritischen Bemerkungen sei ihnen aufrichtig gedankt. Herrn Professor Dr. E. MOLLWO schulde ich außerdem Dank für die Anregung zu dieser Arbeit sowie für die mir gebotene Möglichkeit, an seinem Institut zu arbeiten.

Lebenslauf:

Am 18. Mai 1936 wurde ich als drittes Kind des kaufmännischen Angestellten Wilhelm Otto Krieg und seiner Ehefrau Rosa, geb. Deglmann geboren. Von 1942 bis 1947 besuchte ich die Volksschule in Nürnberg, Krakau, Bamberg und nach dem Krieg wieder in Nürnberg. 1947 trat ich in die damalige Oberrealschule an der Löbleinstraße in Nürnberg ein und legte dort 1956 die Reifeprüfung ab. Im Wintersemester 1956/57 begann ich das Studium der Physik in Erlangen. 1957/58 studierte ich zwei Semester an der Universität München. Nach dem 5. Semester bestand ich das Vordiplomexamen in Physik, nach dem 6. Semester das Vorexamen für das höhere Lehramt in Mathematik und Physik. Nach dem 10. Semester legte ich die Hauptprüfung für das Lehramt an höheren Schulen mit Mathematik im Hauptfach ab. Seit Oktober 1960 gehörte ich dem Institut für angewandte Physik der Universität Erlangen an. Von November 1962 bis Dezember 1965 war ich dort als Verwalter einer wissenschaftlichen Assistentenstelle angestellt. Im November 1965 legte ich noch die Diplomprüfung in Physik ab, nachdem mittlerweile feststand, daß ich nicht ins Lehrfach gehen würde. Ab Januar 1966 arbeite ich bei der IBM - Deutschland an Systemprogrammen. Im August 1964 ehelichte ich die Tochter des Diplomingenieurs Max Michaelis, Margot Michaelis.

